量子物理

基本常数

$$c = 3.0 \times 10^{8} m/s$$

$$h = 6.626 \times 10^{-34} J \cdot s$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s$$

$$e = 1.602 \times 10^{-19} C \qquad \varepsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} F/m$$

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} kg \qquad G = 6.67 \times 10^{-11} N \cdot m^2 \cdot kg^{-2}$$

$$k = 1.381 \times 10^{-23} J/k$$

常数组合

$$E_0^e = m_e c^2 = ?MeV$$

$$hc = ?eV \cdot nm$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = ?eV \cdot nm$$

常数组合

$$E_0^e = m_e c^2 = 0.511MeV$$

$$hc = 1240eV \cdot nm$$

$$\hbar c = 197.35eV \cdot nm$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 1.44eV \cdot nm$$

精细结构常数

$$\alpha = \frac{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}{\hbar c}$$

$$= \frac{1.44eV \cdot nm}{197.35eV \cdot nm} \approx \frac{1}{137}$$

一、基本要求

1. 理解光的粒子性：热辐射现象、光电效应，康普顿效应。

2. 掌握德布罗意假设和实验证明，理解波粒二象性；理解波函数及其统计解释，掌握不确定关系。

3. 了解量子力学基本假设，掌握一维势阱的态函数和能量，了解隧道效应。

4. 掌握氢原子的玻尔模型，理解原子电子结构的量子理论，了解多电子原子的排布规律。

二、基本内容

I. 辐射量子性：

1、黑体辐射
2、光电效应
3、康普顿效应

II. 粒子波动性：

1、德布罗意波 （波粒二象性）
2、波函数统计解释
3、不确定关系(测不准原理）

III、量子力学基本公设*：薛定谔方程

IV、基本模型

1、一维势阱/势垒
2、氢原子（玻尔模型，量子理论）

I. 辐射量子性

0光子的静止质量、动量和能量（$m_o = 0$）

$$\beta = \frac{v}{c} = \frac{pc}{E} \qquad E^2 = E_0^2 + (pc)^2$$

$$E = h\nu, \qquad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda},$$

光强 $I = nh\nu$ n 单位时间、单位面积光子数目

Ex：波长λ的一束光以入射角i照射在平面镜上的光压（设光束单位体积中的光子数为n）

$$p = \frac{2nhc}{\lambda}\cos^2 i$$

Ex15-3一般认为光子具有以下性质

（A）不论在真空或介质中，

它的速率都等C;

（B）它的静止质量为零；

（C）它的总能量就是它的动能；

（D）它的动量为 $h\upsilon/c^2$ ；

（E）它有动量和能量，但没有质量。

答案：（B），（C）

$$(E = m_o c^2 + E_k = mc^2)$$

（1）黑体辐射定律

（a）斯特藩—波耳兹曼定律：

$$M(T)=\sigma T^{4} \qquad \sigma=5.67\times10^{-8}W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}$$

（b）维恩位移定律：

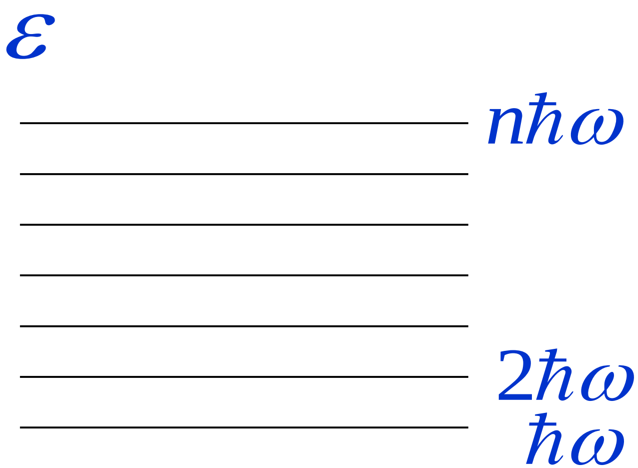
$$\lambda_{m}T=b \qquad b=2.89\times10^{-3}\quad m\cdot K$$

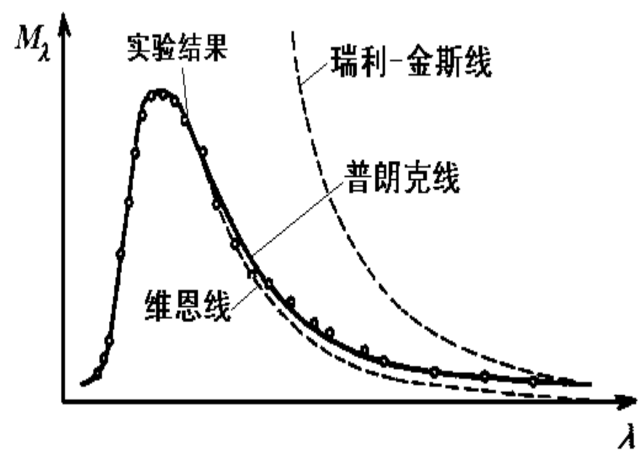
普朗克量子假设

辐射黑体的分子、原子运动，可看作谐振子，它发射和吸收辐射能量是某些分立状态，是最小能量的整数倍，即

$\varepsilon = nh\nu \quad n=1,2,\cdots$能量量子数$, h = 6.63\times10^{-34}\,J\cdot s$

$$M_\nu(T)\mathrm{d}\nu = \frac{2\pi h}{c^2}\frac{\nu^3\mathrm{d}\nu}{\mathrm{e}^{h\nu/kT}-1} \qquad (15\text{-}6)$$





(15-7)

量纲分析

$$b = b(h, c, k) ? = const \frac{hc}{k}$$

数量级估计

$$\sigma = \frac{2\pi^5}{15} \frac{k^4}{h^3 c^2}$$

量纲分析

$$b = \lambda_m T =$$

$$= \frac{kT \cdot \lambda_m}{k}$$

$$b = const \frac{hc}{k}$$

p332, 1/4.965

数量级估计 p333

$$\sigma = \frac{2\pi^5}{15}\frac{k^4}{h^3c^2}$$

$$= 2\pi(\pi^2)^2\frac{1.381}{15}(\frac{1.381}{6.626})^3\frac{1}{9}\frac{10^{-23\times 4}}{10^{-34\times 3+16}}$$

$$= 6\times 10^2\frac{1}{10}\frac{1}{125\times 8}10^{-6} = 6\times 10^{-8}$$

Ex15-1 下面各物体,哪个是绝对黑体（　　）

(1)不辐射可见光的物体;

(2)不辐射任何光线的物体;

(3)不能反射可见光的物体;

(4)不能反射任何光线的物体.

问：能量均分定理是什么？什么是紫外灾难？

例 在加热黑体的过程中，其单色辐出度的最大值所对应的波长由 0.69μm变化到 0.50μm，其总辐出度增加了几倍?

解：

$$\begin{cases} M_B = \sigma T^4 \\ \lambda_m T = b \end{cases} \Rightarrow \frac{M_{B2}}{M_{B1}} = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^4 = \left(\frac{\lambda_{m1}}{\lambda_{m2}}\right)^4 = 3.63$$

估算太阳和地球表面温度。

$$\lambda_m T = b \qquad b = 2.89\times10^{-3} \quad m\cdot K$$

$$\lambda_m = 500nm \qquad T_S = 5.8\times10^3 K$$

$$\sigma T_S^4 \frac{4\pi R_S^2}{4\pi d_{SE}^2}\pi r_E^2 = \sigma T_E^4 4\pi r_E^2$$

$$T_E = T_S\sqrt{\frac{R_S}{2d_{SE}}} = 5.8\times10^3\times\sqrt{\frac{7\times10^8}{2\times1.5\times10^{11}}}K$$

$$T_E = T_S\sqrt{\frac{R_S}{2d_{SE}}} = 280K$$

15-10 太阳可看作半径为 7.0×10^8 m 的球形黑体，试计算太阳表面的温度. 设太阳射到地球表面上的辐射能量为 1.4×10^3 W · m^{-2}，地球与太阳间的距离为 1.5×10^{11} m.

光子气体

$$p=\frac{\frac{1}{6}ncdtdA\cdot\frac{2h\bar{\nu}}{c}}{dtdA}=\frac{nh\bar{\nu}}{3}=\frac{u}{3}$$

$$M=\frac{c}{4}u \qquad u=aT^4$$

$$p=\frac{aT^4}{3}$$

（2）光电效应爱因斯坦方程

$$h\nu = \frac{1}{2}mv_{max}^2 + W = eU_0 + h\nu_0$$

截止频率 $\nu_0 = W/h$

遏止电压 $\frac{1}{2}mv_{max}^2 = eU_0$

讨论

1．光电效应中，单位时间逸出光电子的多少依赖于

（A）入射光的强度和频率；

（B）入射光的强度和相位；

（C）入射光的频率和相位；　答案：（A）

（D）入射光振动方向和频率

2.已知某金属的逸出功为W，若用频率为ν_1的单色光照射该金属能产生光电 效应，则该金属的红限频率ν_0=________，遏止电势差为 W/h ________________。 $\dfrac{h\nu_1 - W}{e}$

$$eU = h\nu_1 - W$$

$(\upsilon_1 > \upsilon_2 > \upsilon_o)$

3．分别以频率为 υ_1和υ_2的光照射光电管当两频率入射光强度相同时，所产生的光电子初动能 E_{k1} ____ E_{k2} ；为阻止光电子到达阳极，所加的遏止电压 $|V_1|$ ____ $|V_2|$，所产生的饱和光电流强度 I_1 ____ I_2。

（填上>，<或=符号）

答案：$E_{k1} > E_{k2}$ $|V_1| > |V_2|$

$I_1 < I_2$（光强相同光子能量 $h\upsilon$ 不同，光子数不同）

4． 波长$\lambda=589.3nm$的光照射到钾金属表面，$U_0=0.36V$，计算$E_{k\max}$和υ_0

解： $$eU_0=\frac{1}{2}mv^2$$

即 $$E_{k\max}=0.36eV$$

又由 $$h\upsilon=\frac{1}{2}mv^2+W$$

所以 $$W=h\upsilon-\frac{1}{2}mv^2=h\frac{c}{\lambda}-eU_0=1.75\text{eV}$$

又 $$W=h\upsilon_0$$

$$v_0=\frac{W}{h}=4.22\times10^{14}Hz$$

（3）康普顿效应

弹性碰撞：能量和动量守恒

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \lambda_c(1 - \cos\theta)$$

$$\lambda_c = \frac{hc}{m_e c^2} = 0.00243nm$$

Ex 证明：自由空间中电子不能吸收光子。（能量和动量守恒不能同时满足）

例　康普顿效应的主要特点是：

（A） 散射光的波长均比入射光短，且随散射角增大而减少，但与散射体的性质无关.

（B） 散射光的波长均与入射光相同，与散射角、散射体的性质无关.

（C） 散射光中既有与入射光波长相同的，也有比它长和短的，这与散射体的性质有关.

（D） 散射光中有些波长比入射光波长长，且随散射角增大而增大，有些与入射光波长相同，这都与散射体的性质无关.

Ex15-2光电效应和康普顿效应都包含有电子与光子的相互作用过程，对此，在以下几种理解中，正确的是

(A)两种效应中电子与光子两者组成的系统都服从动量守恒和能量守恒定律。

(B)两种效应都相当于电子与光子的弹性碰撞过程。

(C)两种效应都相当于电子对光子的吸收过程。

(D)光电效应是吸收光子的过程，而康普顿效应则相当于光子与电子的弹性碰撞过程。

2. 用光强为I，波长为λ的X射线分别照射锂（Z=3）和铁（Z=26），若在同一散射角下测得康普顿的X射线波长分别为λ_{Li}和λ_{Fe}，它们对应的强度分别为I_{Li}和I_{Fe}，则

（A）$\lambda_{Li} > \lambda_{Fe}$，$I_{Li} < I_{Fe}$；（B）$\lambda_{Li} = \lambda_{Fe}$，$I_{Li} = I_{Fe}$；

（C）$\lambda_{Li} = \lambda_{Fe}$，$I_{Li} > I_{Fe}$；（D）$\lambda_{Li} < \lambda_{Fe}$，$I_{Li} > I_{Fe}$。

(C)

3. 康 普 顿 效 应 中 λ 射 光 波 长 $\lambda=0.711\times10^{-10}m=0.0711nm$，求：

（1）光子的能量；

（2）光子的动量；

（3）$\theta=180°$ 散射光波长；

（4）反冲电子的动能。

（5）反冲电子的速度。

（6）反冲电子的德布罗意波长。

Ref: Ex15-13,14,15

解：

λ=0.711×10^{-10}m=0.0711nm

（1）$E = h\nu = \dfrac{hc}{\lambda} = 1.75\times10^{4}eV = 2.797\times10^{-15}J$

（2）
$$p = \frac{E}{c} = 1.75\times10^{4}\,\mathrm{eV/c}$$
$$p = \frac{h}{\lambda} = 9.32\times10^{-24}kg\cdot m\cdot s^{-1}$$

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1-\cos\theta)$$

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = \frac{hc}{mc^2} = 0.00243nm$$

（3）$\lambda' = \lambda + \dfrac{h}{mc}(1-\cos\theta) = 0.0711 + 0.00486$

$$= 0.07596nm$$

（4） $E+E_0^e=E'+E^e$

$$E_k^e=E^e-E_0^e=E-E'$$

$$=\frac{hc}{\lambda}-\frac{hc}{\lambda'}=1.12\times10^3 eV$$

（5） $E^e=E_0^e+E_k^e=5.1212\times10^5 eV$

$$pc=\sqrt{E^2-E_0^2}=3.385\times10^4 eV$$

$$v=\frac{pc}{E}c=\frac{0.3385}{5.1212}c=0.0661c$$

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2$$

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{mc^2}} c = \sqrt{\frac{2 \times 0.0112}{5.11}} c = 0.0662c$$

（6） $$\lambda = \frac{hc}{pc} = \frac{1240}{3.385 \times 10^4} nm$$

$$= 0.0366nm = 3.66 \times 10^{-11} m$$

II. 粒子波动性

（1）德布罗意波：

$$E = h\nu, \ \lambda = \frac{h}{p}$$

1． 已 知 微 观 粒 子 动 能 为E_k(或$E_k = eU$)，求其德布罗意波长（相应频率）

解：非相对论性粒子 $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$

则得 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{2E_k mc^2}}$

若计算相应频率：

因 $E = h\nu$

$\therefore \nu = E/h = E_k/h$

注：计算 ν 时，不能由 $E_k = \frac{1}{2}mv^2$ 计算出 v

再由 $\nu = v/\lambda$ 计算 ν!

例　电子显微镜中的电子从静止开始通过电势差为 U 的静电场加速后，其德布罗意波长是 0.04nm，则 U 约为（　　）

（1） 150 V　　　　（2） 330V

（3） 630V　　　　（4） 940V

Ex15-23

15-23 求温度为 27 ℃时，对应于方均根速率的氧气分子的德布罗意波的波长.

例： 设氢原子的动能等于氢原子处于温度为 T 的热平衡状态时的平均动能，氢原子的质量为 m，那么此氢原子的德布罗意波长为

(**A**) $\lambda = \dfrac{h}{\sqrt{3mkT}}$ (**B**) $\lambda = \dfrac{h}{\sqrt{5mkT}}$

(**C**) $\lambda = \dfrac{\sqrt{3mkT}}{h}$ (**D**) $\lambda = \dfrac{\sqrt{5mkT}}{h}$

$$E_k = \frac{3}{2}kT \qquad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2E_k m}} = \frac{h}{\sqrt{3mkT}}$$

相对论性粒子Ex15-24

15–24 考虑到相对论效应，试求实物粒子的德布罗意波长的表达式. 设 E_k 为粒子的动能，m_0 为粒子的静止质量.

$$E = E_0 + E_k \qquad E^2 = E_0^2 + (pc)^2$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{pc}$$

所以

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{E_k^{\ 2} + 2E_k m_o c^2}}$$

可见当

$$E_k << m_o c^2 \text{时}, \quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2E_k m}}$$

非相对论性粒子

例 静止质量不为零的微观粒子作高速运动，这时粒子物质波的波长 λ 与速度 v 有如下关系（　　）

(1) $\lambda \propto v$　　　　(2) $\lambda \propto 1/v$

(3) $\lambda \propto \sqrt{\dfrac{1}{v^2} - \dfrac{1}{c^2}}$　　　　(4) $\lambda \propto \sqrt{c^2 - v^2}$

14．4207：令 $\lambda_c = h/(m_e c)$（称为电子的康普顿波长，其中 m_e 为电子静止质量，c 为真空中光速，h 为普朗克常量）。当电子的动能等于它的静止能量时，它的德布罗意波长是 λ =_______ λ_c。

$$\frac{\sqrt{3}}{3}$$

（2）波函数的统计解释

概率密度 表示在某处**单位体积**内粒子出现的**概率** $|\Psi|^2=\psi\psi^*$ 正实数

某一时刻出现在某点附近在体积元 $\mathrm{d}V$ 中的粒子的**概率**为 $|\Psi|^2\mathrm{d}V = \Psi\Psi^*\mathrm{d}V$

归一化条件 $\int|\Psi|^2\mathrm{d}V=1$

标准条件 波函数**单值，有限，连续.**

例 实物粒子的德布罗意波与电磁波有什么不同？ 解释描述实物粒子的波函数德物理意义.

答：

（1）实物粒子的德布罗意波是反映实物粒子在空间各点分布的规律，电磁波是反映 $\vec{E}$ 和 $\vec{H}$ 在空间各点分布的规律.

（2）实物粒子的波函数的模的平方表示该时刻该位置处粒子出现的几率密度.

14．8020：将波函数在空间各点的振幅同时增大 D 倍，则粒子在空间的分布概率将

(A) 增大 D^2 倍 (B) 增大 $2D$ 倍 (C) 增大 D 倍 (D) 不变

D

例 已知粒子在一维矩形无限深势阱中运动，其波函数为：$\varphi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\dfrac{3\pi x}{2a}\ (-a<x<a)$，则粒子在 $x=5a/6$ 处出现的概率密度为 （　　）

(1) $1/2a$　　(2) $1/a$

(3) $1/\sqrt{2a}$　　(4) $1/\sqrt{a}$

Ex15-5

15－5 已知粒子在一维无限深方势阱中运动，其波函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi}{a}x \qquad (0\leqslant x\leqslant a)$$

那么粒子在 $x=a/6$ 处出现的概率密度为（　　）

*Ex15-33 归一化、概率密度函数、区间概率

*15–33 已知一维运动粒子的波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0\ , & x<0\end{cases}$$

式中 $\lambda>0$. 试求:(1) 归一化常量 A 和归一化波函数;(2) 该粒子位置坐标的概率分布函数(又称概率密度);(3) 在何处找到粒子的概率最大.

$$A=2\lambda^{3/2}\qquad \psi(x)=\begin{cases}2\lambda\sqrt{\lambda}\,xe^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0\ , & x<0\end{cases}$$

粒子的概率分布函数为

$$|\psi(x)|^2=\begin{cases}4\lambda^3x^2e^{-2\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0\ , & x<0\end{cases}$$

$$x=\frac{1}{\lambda}$$

（3）不确定关系（位置与动量不能同时精确确定）：

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

能量-时间测不准关系 $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

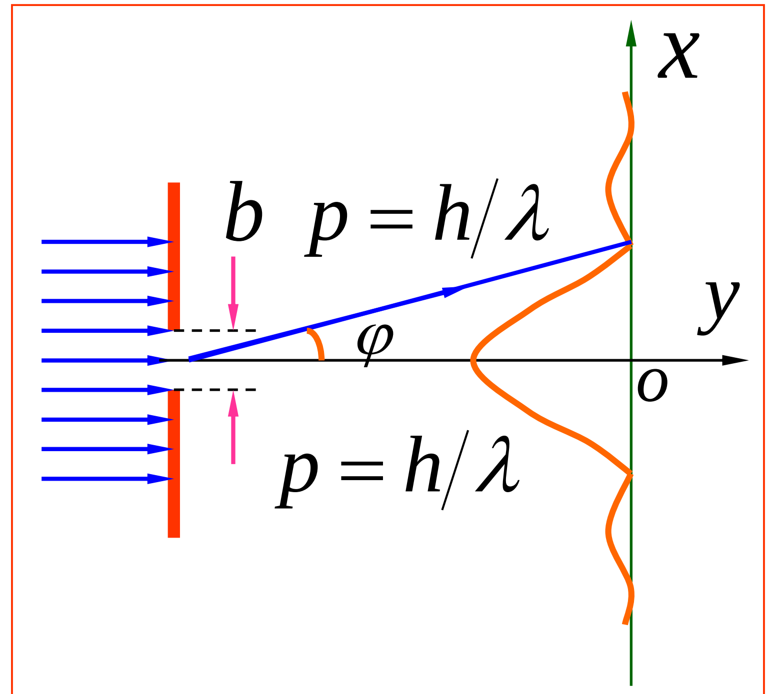
$$E = \frac{p^2}{2m} \qquad \Delta E = \frac{p}{m}\Delta p = v\Delta p$$

$$E^2 = E_0^2 + (pc)^2 \qquad \Delta E = \frac{pc}{E}\Delta(pc) = v\Delta p$$

$$\Delta E \Delta t = v\Delta t \Delta p = \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

电子单缝衍射Ex15-30

$$\sin\varphi = \lambda / b$$



电子的单缝衍射实验

电子经过缝时的**位置**不确定 $\Delta x = b$

电子经过缝后 x 方向动量不确定

$$\Delta p_x = p\sin\varphi = p\frac{\lambda}{b}$$

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

考虑衍射次级有

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq h}$$

Ex15-4 不确定关系式 $\Delta x \Delta p_x \geq h$ 表示在 x 方向上（　）

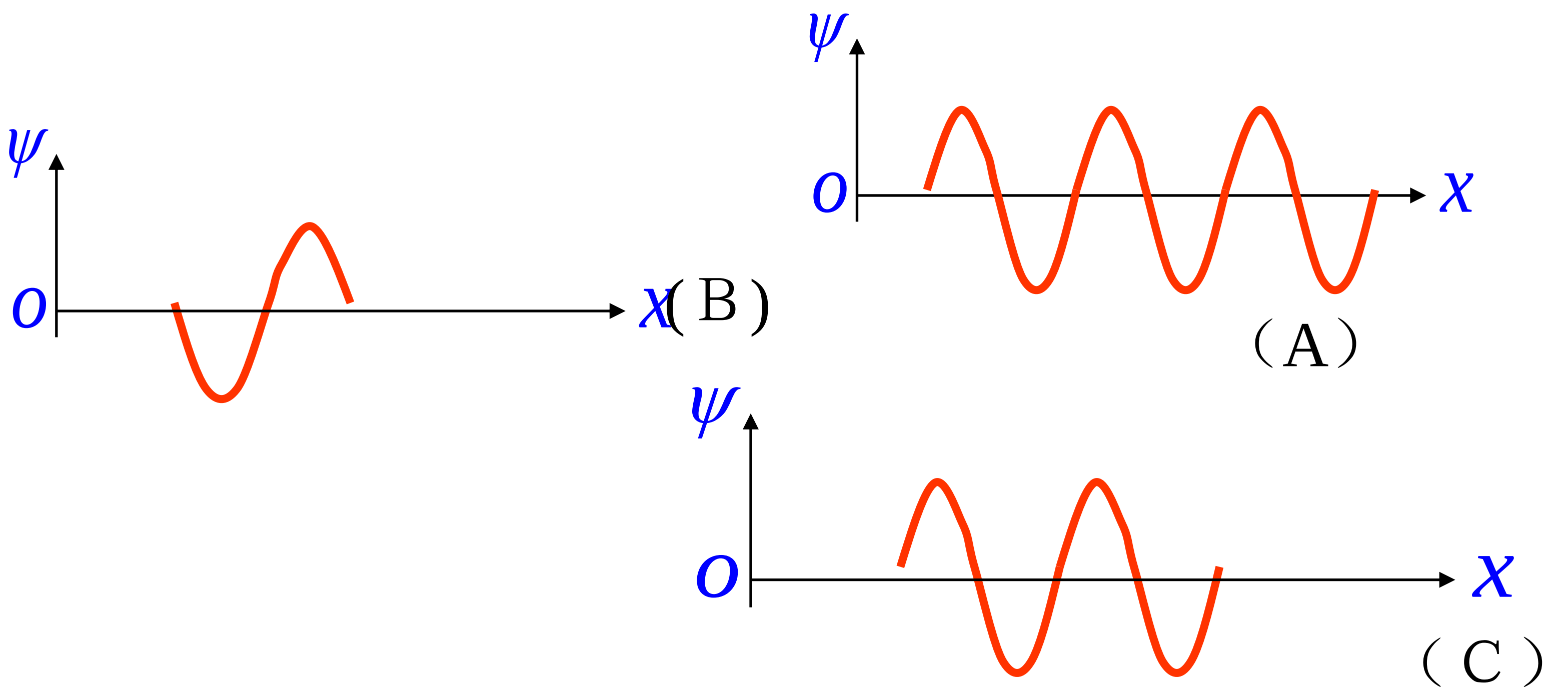
(1) 粒子的位置不能确定;

(2) 粒子的动量不能确定;

(3) 粒子的位置和动量都不能确定;

(4) 粒子的位置和动量不能同时确定.

3． 设粒子运动的波函数分别如图A、B、C所示，那么其中_____图确定粒子动量准确度高，____图确定粒子位置准确度高。



答案: （A），（B）

Ex15-32氦氖激光器所发红光波长为 $\lambda = 632.8\text{nm}$，谱线宽度 $\Delta\lambda = 10^{-9}\ \text{nm}$，**求**当这种光子沿 X 方向传播时，它的 X 坐标的不确定量多大**?**

解：光子具有波粒二象性 $p_x = h/\lambda$

数值关系 $\Delta p_x = \dfrac{h}{\lambda^2}\Delta\lambda$　　$\Delta x \Delta p_x \geq h$

$$\Delta x \geq \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} \qquad \Delta x \approx \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = \frac{(632.8\times10^{-9})^2}{10^{-18}}$$

$$\Delta x \approx 4\times10^5\,\text{m} = 400\text{km}$$

Δx为波列长度，光子的位置不确定量也就是波列的长度. 原子在一次能级跃迁过程中发射一个光子或说发出一列波.

利用不确定关系，估算某些物理量值

例：试用不确定关系式，估算一维谐振子的零点能量。

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\overline{E} = \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \Delta x^2$$

$$\geq 2\sqrt{\frac{\Delta p^2}{2m} \cdot \frac{1}{2} m\omega^2 \Delta x^2}$$

$$= \Delta x \Delta p \omega$$

$$\geq \frac{1}{2} \hbar \omega$$

III、量子力学基本假设*

Postulate1: 概率波作为态函数

Postulate2、力学量对应厄密算符

$$\boxed{\hat{\vec{r}} = \vec{r}} \qquad \boxed{\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla}$$

Postulate3：测量公设

$$\overline{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\hat{F}\,\Psi(x)\,\mathrm{d}x$$

Postulate4:薛定谔方程

Postulate5: 全同粒子

电子（费米子）：**Pauli**不相容原理

哈密顿（Hamilton）量

$$\boxed{\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+U(\vec{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r},t)}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\,\Psi}$$

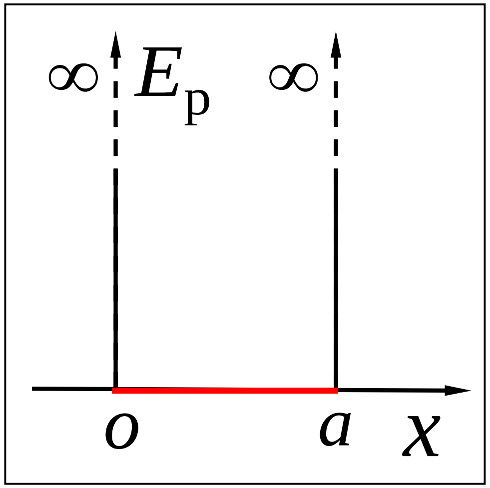
●定态：

$$\boxed{\Psi_E(\vec{r},t)=\Phi_E(\vec{r})\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}} \qquad （15\text{-}33）$$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right)\Phi(\vec{r})=E\,\Phi(\vec{r})}$$

IV、基本模型

1、一维无限深方势阱



$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right)\Phi(\vec{r})=E\Phi(\vec{r})}$$

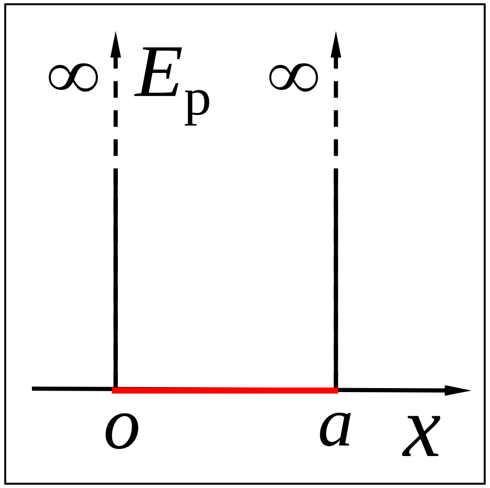
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$$

$$\psi(x)=A\sin kx=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin kx$$

$$k=\frac{n\pi}{a},\quad n=1,2,3,\cdots \qquad E=\frac{(\hbar k)^2}{2m}=n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

15-26 用德布罗意波仿照弦振动的驻波公式，来求解一维无限深方势阱中自由粒子的能量与动量表达式.

Ex 15-26 德布罗意波 驻波



$$a = n\frac{\lambda}{2}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = n\frac{h}{2a} = \hbar k$$

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

在一维无限深方势阱中，已知势阱宽为 a，试用不确定关系式估算零点能量

解：设不确定范围 $\Delta x = a$

由不确定关系式得$\Delta x \Delta p_x = h$

$$\Delta p = \frac{h}{\Delta x} = \frac{h}{a}$$

则 $$E_1 = \frac{\Delta p^2}{2m} = \frac{h^2}{2ma^2}$$

（若取$p = \frac{1}{2}\Delta p = \frac{h}{2a}$，则$E_1 = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8ma^2}$）

例 在一维无限深势阱中运动的粒子波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}) \qquad (0\le x\le a)$$

求 当 $n=1$ 时，粒子在什么位置附近出现的概率最大.

解：$n=1$ 时概率密度

$$|\psi_n(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})$$

$$\sin^2(\frac{\pi x}{a})=1 \Rightarrow \frac{\pi x}{a}=k\pi+\frac{\pi}{2}$$

$$x=(k+\frac{1}{2})a$$ 粒子在 $x=\frac{1}{2}a$ 附近出现的概率最大.

x=0到x=a/3之间的概率

$$P=\frac{2}{a}\int_0^{a/3}\sin^2\frac{n\pi x}{a}dx$$

$$=\frac{2}{a}\left[\frac{x}{2}-\frac{a}{4n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]_0^{a/3}$$

15-36 一电子被限制在宽度为1.0×10^{-10} m的一维无限深方势阱中运动，(1) 欲使电子从基态跃迁到第一激发态需给它多少能量？(2) 在基态时，电子处于 $x_1=0.090\times10^{-10}$ m 与 $x_2=0.110\times10^{-10}$ m 之间的概率为多少？(3) 在第一激发态时，电子处于 $x_1'=0$ 与 $x_2'=0.25\times10^{-10}$ m 之间的概率为多少？

从基态($n=1$)跃迁到第一激发态($n=2$)所需能量：

$$\Delta E=E_2-E_1=n_2^2\frac{h^2}{8ma^2}-n_1^2\frac{h^2}{8ma^2}=112\ \text{eV}$$

$$P_1=\int_{x_1}^{x_2}|\psi(x)|^2dx\approx|\psi_1(x_C)|^2\Delta x$$

$$=\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}\cdot\frac{x_1+x_2}{2}\right)(x_2-x_1)$$

$$=3.8\times10^{-3}$$

2．氢原子理论（玻尔理论）

（0）卢瑟福核式模型

（1）氢原电光谱实验规律

（2）玻尔假设

1、定态假设

2、频率条件 $h\nu = E_i - E_f$

对应原理⇒ 3、角动量量子化

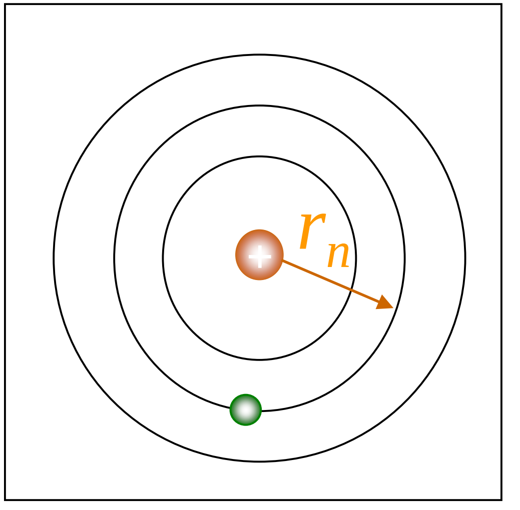
$$L = rmv = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar \qquad n = 1,2\cdots$$

氢原子轨道半径和能量的计算

经典力学

动力学： $$\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n^2} = m\frac{v_n^2}{r_n}$$

能量： $$E_n = \frac{1}{2}mv_n^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}$$



$$E_n = -\frac{1}{2}mv_n^2 = \frac{1}{2}\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_n}\right)$$

(0)电子速度

$$\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} = r_n m v_n^2 = n\hbar v_n$$

$$v_n = \frac{Ze^2}{n\hbar 4\pi\varepsilon_0} = \frac{Z}{n}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}/\hbar c\right)c = \frac{Z}{n}\alpha c$$

精细结构常数

$$\alpha = \frac{\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}}{\hbar c} = \frac{1.44eV\cdot nm}{197.4eV\cdot nm} \approx \frac{1}{137}$$

(1) 轨道半径

$$r_n = \frac{n^2}{Z}\frac{1}{\alpha}\frac{\hbar c}{mc^2} = \frac{n^2}{Z} r_1 \quad (n = 1,2,3,\cdots)$$

$n=1$，玻尔半径 $r_1 = \dfrac{1}{\alpha}\dfrac{\hbar c}{mc^2} = 5.29\times10^{-11}\,\mathrm{m}$

（2）能量

基态能量 $(n=1)$ $\quad E_1=-\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2=-13.6eV$

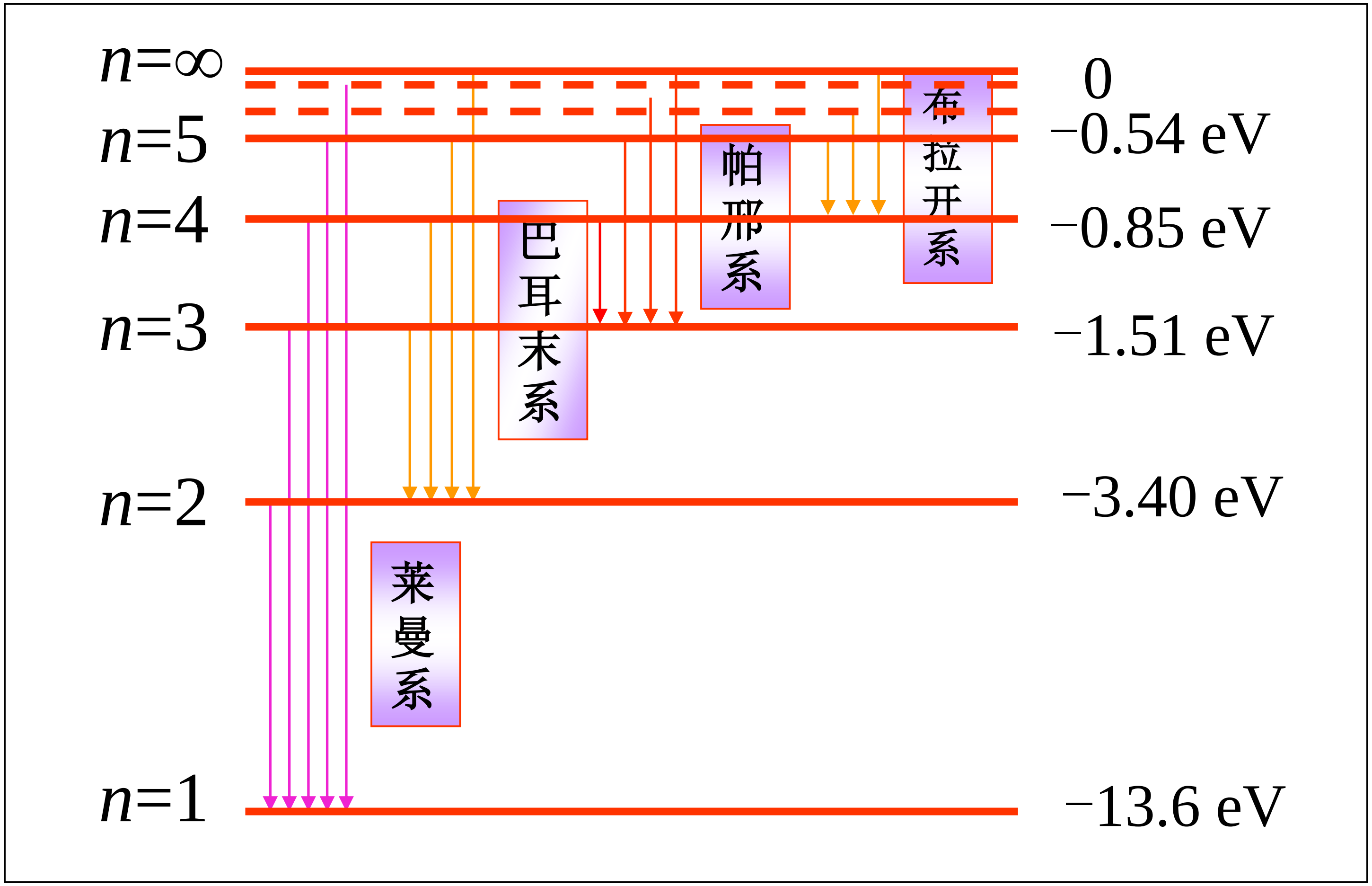
激发态能量 $(n>1)$ $\quad E_n=\frac{Z^2}{n^2}E_1$

$$h\nu=E_i-E_f$$

$$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}=\frac{\nu}{c}=\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{n_f^2}-\frac{1}{n_i^2}\right),\quad n_i>n_f$$

$$\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}=1.097\times10^7\,\mathrm{m}^{-1}\approx R$$ （里德伯常量）

氢原子能级跃迁与光谱图



例　按照玻尔理论,电子绕核作圆周运动时,电子的角动量 L 的可能值为（　　）

(1) 任意值

(2) $nh\,,\ n=1,2,3\cdots\cdots$

(3) $2\pi nh\,,\ \mathrm{n}=1,2,3\cdots\cdots$

★ (4) $\dfrac{nh}{2\pi}\,,\ n=1,2,3\cdots\cdots$

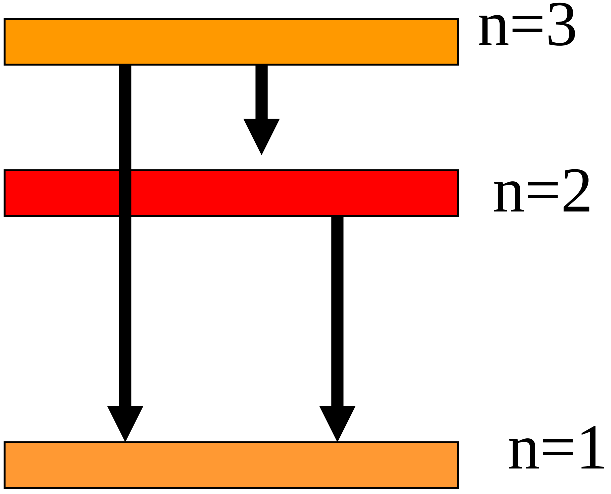
10.由氢原子理论知，当大量氢原子处于第二激发态，原子跃迁将发出

(A)一种波长的光。

(B)两种波长的光。

(C)三种波长的光。

(D)连续光谱。



根据玻尔理论

(1) 计算氢原子中电子在量子数为n的轨道上作圆周运动的频率；

(2) 计算当该电子跃迁到(n-1)的轨道上时所发出的光子的频率；

(3) 证明当n很大时，上述(1)和(2)结果近似相等.

15-20 试证在基态氢原子中，电子运动时的等效电流为 1.05×10^{-3} A. 在氢原子核处，这个电流产生的磁场的磁感强度为多大?

解 根据分析，电子绕核运动的等效电流为

$$I=ef=\frac{ev_1}{2\pi a_0}=\frac{eh}{4\pi^2 ma_0^2}=1.05\times10^{-3}\ \text{A}$$

该圆形电流在核处的磁感强度为

$$B=\frac{\mu_0 I}{2a_0}=12.5\ \text{T}$$

玻尔磁子

$$\mu_B=IS=I\cdot\pi a_B^2$$

一个氢原子从基态激发到n=4的激发态，求：
（1）原子所吸收的能量；
（2）原子回到基态过程中所发谱线数目；
（3）若氢原子原来静止，则从 n=4的激发态直接跃迁回基态时，氢原子获得的反冲速率。

12.18eV,6,4.08m/s

3. 量子力学求解多电子原子(含氢原子)的结果

(1) 氢原子和4个量子数 (n、l、m_l、m_s)

量子态

- (主要)能量 $E_n = \dfrac{E_1}{n^2}$ $E_1 = -13.6\text{eV}$ $n = 1,2,3,\cdots$
- 角动量 $L = \sqrt{l(l+1)}\dfrac{h}{2\pi}$ $l = 0,1,2,\cdots(n-1)$ **n种取值**
- 角动量空间取向 $L_z = m_l \dfrac{h}{2\pi}$ $m_l = 0,\pm1,\cdots\pm l$ **(2l+1) 种取值**
- 自旋角动量 $S = \sqrt{s(s+1)}\dfrac{h}{2\pi} = \dfrac{\sqrt{3}}{2}\dfrac{h}{2\pi}$ $(s = \dfrac{1}{2})$
- 自旋角动量空间取向 $S_z = m_s \dfrac{h}{2\pi}$ $m_s = \pm\dfrac{1}{2}$ **2种取值**

能用4个量子数描述核外电子状态

(2) 多电子原子问题

a. 壳层结构(含氢原子)

能量— 壳层(n)	K(1)	L(2)	M(3)
角动量— 支壳层(l)	$1s(0)$	$2s(0)2p(1)$	$3s(0)3p(1)3d(2)$
		$\underbrace{2 \quad 6}_{8}$	$\underbrace{2 \quad 6 \quad 10}_{18}$
量子态数目	2	8	18

b. 排布原理及电子组态

壳层结构

Pauli原理

能量最小原理

$\longrightarrow$ 基态原子的电子组态

(1-28号元素)

核外电子数

V、实验基础

光具有粒子性的实验有：(　　)，

光电效应，康普顿效应

原子具有能级的实验有：(　　)，

弗兰克·赫兹实验

电子具有自旋的实验有：(　　)，

施特恩——格拉赫实验

电子具有波动性的实验：(　　).

戴维孙——革末实验